T. S. Tinyukova, Scattering and quasilevels in the SSH model, *Vestn. Udmurtsk. Univ. Mat. Mekh. Komp. Nauki*, 2017, Volume 27, Issue 2, 257–266

DOI: <https://doi.org/10.20537/vm170209>

Use of the all-Russian mathematical portal Math-Net.Ru implies that you have read and agreed to these terms of use

<http://www.mathnet.ru/eng/agreement>

Download details:

IP: 54.205.225.156

April 26, 2023, 12:55:45

УДК 517.958, 530.145.6

© Т. С. Тинюкова

О РАССЕЯНИИ И КВАЗИУРОВНЯХ В МОДЕЛИ SSH

Топологический изолятор — особый тип материала, который внутри («в объеме») представляет собой изолятор, а на поверхности проводит электрический ток. Простейшим топологическим изолятором является конечная цепочка атомов в полиацетилене. Тематика топологических изоляторов в рамках физики твердого тела очень актуальна в последнее время. Большой интерес в физической литературе к топологическим изоляторам (а также похожим на них в смысле топологии сверхпроводящим системам) в значительной степени вызван наличием связи, «соответствием» между «объемом» и «границей». В данной статье рассматривается дискретная модель SSH (Su–Schrieffer–Heeger) для полиацетилена, описывающая электрон в одномерной цепочке атомов с двумя чередующимися амплитудами перехода на соседний атом. Найдены резольвента и спектр рассматриваемого оператора. Исследованы квазиуровни (собственные значения и резонансы) в случае малого потенциала. Кроме того, найдено решение уравнения Липпмана–Швингера и получены асимптотические формулы для вероятностей прохождения и отражения в случае малого возмущения.

Ключевые слова: резольвента, спектр, собственное значение, резонанс, уравнение Липпмана–Швингера, вероятность прохождения.

DOI: [10.20537/vm170209](https://doi.org/10.20537/vm170209)

Введение

В последнее десятилетие в физической литературе активно изучаются топологические изоляторы (см. [1–5]). Топологический изолятор (ТИ) — особый тип материала, который внутри («в объеме») представляет собой изолятор, а на поверхности проводит электрический ток. ТИ обладают интересными физическими свойствами и могут найти применение в разнообразных устройствах микроэлектроники. Эта тематика интересна не только с физической, но и с математической точки зрения, однако недостаточно изучена математиками.

Простейшим ТИ является конечная цепочка атомов в полиацетилене. Одномерная модель SSH (Su–Schrieffer–Heeger) для полиацетилена была рассмотрена в [3] и описывает электрон в конечной цепочке с двумя чередующимися амплитудами перехода на соседний атом. Рассматриваемая цепочка состоит из N ячеек, а каждая ячейка, в свою очередь, из двух узлов, которые принадлежат разным подрешеткам. В данном одномерном случае роль «объема» играет цепочка без двух граничных атомов, а аналогом поверхности является граница цепочки, т. е. эти два атома. Большой интерес в физической литературе к ТИ (а также похожим на них в смысле топологии сверхпроводящим системам) в большой степени вызван наличием связи, «соответствием» между «объемом» и «границей». Это означает следующее. В «объеме», который моделируется бесконечным кристаллом (в данном случае — бесконечной цепочкой), ТИ наделяются тривиальной или нетривиальной топологией в зависимости от параметров модели (в рассматриваемом случае граница между такими фазами описывается равенством $u = v$, см. [3]). При этом ненулевое число Черна (в одномерном случае — «winding number», т. е. степень некоторого отображения) ТИ связано с наличием «граничных состояний», т. е. собственных значений (во многих случаях — с наличием нулевого собственного значения), волновые функции которых локализованы вблизи границы в конечном кристалле (или цепочке).

В данной статье рассматривается дискретная модель SSH в случае бесконечной (в отличие от [3]) одномерной цепочки атомов. В статье топологические вопросы непосредственно не рассматриваются, однако проведенное в ней исследование собственных значений и резонансов,

как и существенно связанной с ними вероятности прохождения, может уточнить соответствие «объем–граница» для модели SSH (роль границы в статье играет потенциальный барьер).

Рассмотрим гамильтониан H_0 , действующий в пространстве $l^2(\mathbb{Z}) \times l^2(\mathbb{Z})$:

$$H_0 \begin{pmatrix} \psi_1(n) \\ \psi_2(n) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} w\psi_2(n-1) + v\psi_2(n) \\ v\psi_1(n) + w\psi_1(n+1) \end{pmatrix}.$$

Значения v и w означают амплитуды перехода электрона на соседний атом. Считаем, что $v > w > 0$. Оператор H_0 имеет физический смысл оператора кинетической энергии электрона, описываемого функцией $\psi(n) = \begin{pmatrix} \psi_1(n) \\ \psi_2(n) \end{pmatrix} \in l^2(\mathbb{Z}) \times l^2(\mathbb{Z})$.

§ 1. Спектр и резольвента

Теорема 1. Резольвента $R_0(\lambda) = (H_0 - \lambda)^{-1}$ оператора H_0 действует следующим образом:

$$\begin{aligned} (R_0(\lambda)\varphi)_1(n) &= \frac{1}{2wvi \sin k} \sum_{n' \in \mathbb{Z}} (\lambda\varphi_1(n') + v\varphi_2(n')) e^{ik|n-n'|} + \frac{1}{2vi \sin k} \sum_{n' \in \mathbb{Z}} \varphi_2(n') e^{ik|n-1-n'|}, \\ (R_0(\lambda)\varphi)_2(n) &= \frac{1}{2wvi \sin k} \sum_{n' \in \mathbb{Z}} (\lambda\varphi_2(n') + v\varphi_1(n')) e^{ik|n-n'|} + \frac{1}{2vi \sin k} \sum_{n' \in \mathbb{Z}} \varphi_1(n') e^{ik|n+1-n'|}, \end{aligned}$$

где

$$2 \cos k = \frac{\lambda^2 - v^2 - w^2}{wv}, \quad \sin k = -\sqrt{1 - \cos^2 k} < 0. \quad (1)$$

Доказательство. Уравнение $(H_0 - \lambda)\psi = \varphi$ относительно ψ для нахождения резольвенты $R_0(\lambda)$ запишем в виде

$$\begin{aligned} w\psi_2(n-1) + v\psi_2(n) - \lambda\psi_1(n) &= \varphi_1(n), \\ v\psi_1(n) + w\psi_1(n+1) - \lambda\psi_2(n) &= \varphi_2(n). \end{aligned} \quad (2)$$

После преобразования Фурье $F: l^2(\mathbb{Z}) \rightarrow L^2(-\pi, \pi)$, действующего следующим образом:

$$F\psi(n) = \hat{\psi}(p) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \sum_{n \in \mathbb{Z}} e^{-ipn} \psi(n),$$

(2) примет вид

$$\begin{pmatrix} -\lambda & we^{-ip} + v \\ we^{ip} + v & -\lambda \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \hat{\psi}_1 \\ \hat{\psi}_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \hat{\varphi}_1 \\ \hat{\varphi}_2 \end{pmatrix}. \quad (3)$$

Выпишем определитель системы (3):

$$\Delta = \lambda^2 - (w^2 + v^2 + vwe^{ip} + vwe^{-ip}) = \lambda^2 - (w^2 + v^2 + 2vw \cos p).$$

Находим (с помощью формул Крамера)

$$\hat{\psi}_1 = \frac{\lambda\hat{\varphi}_1 + (we^{-ip} + v)\hat{\varphi}_2}{wv(2 \cos p - \zeta)}, \quad \hat{\psi}_2 = \frac{\lambda\hat{\varphi}_2 + (we^{ip} + v)\hat{\varphi}_1}{wv(2 \cos p - \zeta)},$$

где

$$\zeta = \frac{\lambda^2 - v^2 - w^2}{wv}.$$

Справедливо равенство (см. [6])

$$\psi(n) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\pi}^{\pi} e^{in p} \hat{\psi}(p) dp = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\pi}^{\pi} \frac{e^{in p} \hat{\varphi}(p)}{2 \cos p - \zeta} dp = \frac{1}{2i \sin k} \sum_{n' \in \mathbb{Z}} e^{ik|n-n'|} \varphi(n'), \quad (4)$$

где $\zeta = 2 \cos k$, $\sin k = -\sqrt{1 - \cos^2 k} < 0$.

С помощью (4) найдем резольвенту в координатном представлении

$$\begin{aligned}\psi_1(n) &= \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\pi}^{\pi} \frac{(\lambda \widehat{\varphi}_1 + (we^{-ip} + v)\widehat{\varphi}_2) e^{inp}}{wv(2 \cos p - \zeta)} dp = \\ &= \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\pi}^{\pi} \frac{e^{inp} (\lambda \widehat{\varphi}_1 + v\widehat{\varphi}_2)}{wv(2 \cos p - \zeta)} dp + \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\pi}^{\pi} \frac{e^{ip(n-1)} \widehat{\varphi}_2}{v(2 \cos p - \zeta)} dp = \\ &= \frac{1}{2wvi \sin k} \sum_{n' \in \mathbb{Z}} (\lambda \varphi_1(n') + v\varphi_2(n')) e^{ik|n-n'|} + \frac{1}{2vi \sin k} \sum_{n' \in \mathbb{Z}} \varphi_2(n') e^{ik|n-1-n'|}, \\ \psi_2(n) &= \frac{1}{2wvi \sin k} \sum_{n' \in \mathbb{Z}} (\lambda \varphi_2(n') + v\varphi_1(n')) e^{ik|n-n'|} + \frac{1}{2vi \sin k} \sum_{n' \in \mathbb{Z}} \varphi_1(n') e^{ik|n+1-n'|}.\end{aligned}$$

□

Замечание 1. Из (3) очевидно, что H_0 — самосопряженный оператор и спектр H_0 вещественный. Резольвента $R_0(\lambda)$ не существует, если $\Delta = 0$, т. е. если $\lambda = \pm \sqrt{w^2 + v^2 + 2vw \cos k}$. Отсюда следует, что спектр H_0 состоит из двух промежутков:

$$\sigma(H_0) = [-v - w, w - v] \cup [v - w, v + w].$$

§ 2. Квазиуровни

Рассмотрим оператор с экспоненциально убывающим потенциалом $H_\varepsilon = H_0 + \varepsilon V$, где $V = \begin{pmatrix} V_1 g(n) & 0 \\ 0 & V_2 g(n) \end{pmatrix}$, $|g(n)| \leq Ce^{-\alpha|n|}$, $V_1, V_2 \in \mathbb{R}$, $\varepsilon > 0$, $\alpha > 0$. Операторы H_ε и V имеют физический смысл соответственно операторов полной и потенциальной энергии электрона.

Уравнение на собственные значения $(H_0 + \varepsilon V)\psi = \lambda\psi$ или $\psi = -\varepsilon R_0(\lambda)V\psi$, где $\lambda \notin \sigma(H_0)$, оператора H_ε перепишем с учетом вида резольвенты оператора H_0 (см. теорему 1):

$$\begin{aligned}\psi_1(n) &= -\frac{\varepsilon}{2wvi \sin k} \sum_{n' \in \mathbb{Z}} (\lambda V_1 \psi_1(n') + vV_2 \psi_2(n')) g(n') e^{ik|n-n'|} - \\ &\quad - \frac{\varepsilon}{2vi \sin k} \sum_{n' \in \mathbb{Z}} V_2 g(n') \psi_2(n') e^{ik|n-1-n'|}, \\ \psi_2(n) &= -\frac{\varepsilon}{2wvi \sin k} \sum_{n' \in \mathbb{Z}} (\lambda V_2 \psi_2(n') + vV_1 \psi_1(n')) g(n') e^{ik|n-n'|} - \\ &\quad - \frac{\varepsilon}{2vi \sin k} \sum_{n' \in \mathbb{Z}} V_1 g(n') \psi_1(n') e^{ik|n+1-n'|}.\end{aligned}\tag{5}$$

Обозначим $\varphi_i(n) = \sqrt{|g(n)|} \psi_i(n)$, $i = 1, 2$. Тогда

$$\begin{aligned}\varphi_1(n) &= -\frac{\varepsilon \sqrt{|g(n)|}}{2wvi \sin k} \sum_{n' \in \mathbb{Z}} \sqrt{|g(n')|} (\lambda V_1 \varphi_1(n') + vV_2 \varphi_2(n')) e^{ik|n-n'|} - \\ &\quad - \frac{\varepsilon \sqrt{|g(n)|}}{2vi \sin k} \sum_{n' \in \mathbb{Z}} \sqrt{|g(n')|} V_2 \varphi_2(n') e^{ik|n-1-n'|}, \\ \varphi_2(n) &= -\frac{\varepsilon \sqrt{|g(n)|}}{2wvi \sin k} \sum_{n' \in \mathbb{Z}} \sqrt{|g(n')|} (\lambda V_2 \varphi_2(n') + vV_1 \varphi_1(n')) e^{ik|n-n'|} - \\ &\quad - \frac{\varepsilon \sqrt{|g(n)|}}{2vi \sin k} \sum_{n' \in \mathbb{Z}} \sqrt{|g(n')|} V_1 \varphi_1(n') e^{ik|n+1-n'|}.\end{aligned}\tag{6}$$

Определение 1. Значение λ назовем *резонансом* оператора H_ε , если решению $\varphi \in l^2(\mathbb{Z}) \times l^2(\mathbb{Z})$ уравнения (6) соответствует решение (5) $\psi \notin l^2(\mathbb{Z}) \times l^2(\mathbb{Z})$.

Определение 2. *Квазиуровнем* оператора будем называть резонанс или собственное значение.

Перепишем (6) в виде

$$\begin{aligned}\varphi_1(n) &= -\frac{\varepsilon(v+w)\sqrt{|g(n)|}}{2wvik} \sum_{n' \in \mathbb{Z}} \sqrt{g(n')} (\pm V_1 \varphi_1(n') + V_2 \varphi_2(n')) + \varepsilon(K_{11}(k)\varphi_1 + K_{12}(k)\varphi_2)(n), \\ \varphi_2(n) &= -\frac{\varepsilon(v+w)\sqrt{|g(n)|}}{2wvik} \sum_{n' \in \mathbb{Z}} \sqrt{g(n')} (\pm V_2 \varphi_2(n') + V_1 \varphi_1(n')) + \varepsilon(K_{21}(k)\varphi_1 + K_{22}(k)\varphi_2)(n),\end{aligned}$$

где K_{sl} , $s, l = 1, 2$, аналитически зависят от k , знак « $\pm$ » соответствует знаку переменной λ . Экспоненциальное убывание $\sqrt{|g(n)|}$ определяет принадлежность функций $\varphi_i(n)$, $i = 1, 2$ пространству $l^2(\mathbb{Z})$.

Положим $K = \begin{pmatrix} K_{11} & K_{12} \\ K_{21} & K_{22} \end{pmatrix}$, $\xi = \begin{pmatrix} \xi_1 \\ \xi_2 \end{pmatrix}$, $\xi = (1 - \varepsilon K)(\varphi_1, \varphi_2)$. Тогда

$$\begin{aligned}\xi_1(n) &= -\frac{\varepsilon(v+w)\sqrt{|g(n)|}}{2wvik} (\pm V_1 (((1 - \varepsilon K)^{-1}\xi)_1, \sqrt{g}) + V_2 (((1 - \varepsilon K)^{-1}\xi)_2, \sqrt{g})), \\ \xi_2(n) &= -\frac{\varepsilon(v+w)\sqrt{|g(n)|}}{2wvik} (V_1 (((1 - \varepsilon K)^{-1}\xi)_1, \sqrt{g}) \pm V_2 (((1 - \varepsilon K)^{-1}\xi)_2, \sqrt{g}))\end{aligned}\quad (7)$$

и

$$\xi_1(n) = -\frac{\varepsilon(v+w)\sqrt{|g(n)|}}{2wvik} C_1(k), \quad \xi_2(n) = -\frac{\varepsilon(v+w)\sqrt{|g(n)|}}{2wvik} C_2(k). \quad (8)$$

Подставим (8) в (7), получим числовую (при фиксированном k) систему

$$\begin{aligned}C_1(k) &= -\frac{\varepsilon(v+w)}{2wvik} \left(\pm V_1 \left(((1 - \varepsilon K)^{-1} \sqrt{|g|})_1, \sqrt{g} \right) C_1(k) + V_2 \left(((1 - \varepsilon K)^{-1} \sqrt{|g|})_2, \sqrt{g} \right) C_2(k) \right), \\ C_2(k) &= -\frac{\varepsilon(v+w)}{2wvik} \left(V_1 \left(((1 - \varepsilon K)^{-1} \sqrt{|g|})_1, \sqrt{g} \right) C_1(k) \pm V_2 \left(((1 - \varepsilon K)^{-1} \sqrt{|g|})_2, \sqrt{g} \right) C_2(k) \right).\end{aligned}$$

Существование решения получившейся системы эквивалентно равенству

$$\begin{vmatrix} 2wvik \pm \varepsilon(\bar{g} + \alpha(k, \varepsilon))(v+w)V_1 & \varepsilon(\bar{g} + \alpha(k, \varepsilon))(v+w)V_2 \\ \varepsilon(\bar{g} + \alpha(k, \varepsilon))(v+w)V_1 & 2wvik \pm \varepsilon(\bar{g} + \alpha(k, \varepsilon))(v+w)V_2 \end{vmatrix} = 0, \quad (9)$$

где $\bar{g} = \sum_{n \in \mathbb{Z}} g(n)$ и функция $\alpha(k, \varepsilon)$ ограничена равномерно по k из окрестности нуля, т. е.

$$|\alpha(k, \varepsilon)| < C\varepsilon.$$

Перепишем (9) в виде

$$\begin{aligned}(2wvik \pm \varepsilon(\bar{g} + \alpha(k, \varepsilon))(v+w)V_1) \times \\ \times (2wvik \pm \varepsilon(\bar{g} + \alpha(k, \varepsilon))(v+w)V_2) = V_1 V_2 (\varepsilon(\bar{g} + \alpha(k, \varepsilon))(v+w))^2, \\ 2wvik \pm (v+w)\varepsilon(\bar{g} + \alpha(k, \varepsilon))(V_1 + V_2) = 0.\end{aligned}$$

Согласно теореме Руше, уравнение (9) для всех достаточно малых ε имеет единственное решение k , для которого, очевидно, справедливо равенство

$$k = \mp \frac{(v+w)\bar{g}}{2wvi} (V_1 + V_2) \varepsilon + O(\varepsilon^2). \quad (10)$$

В силу (1) и (10) в окрестности нуля справедливо следующее представление:

$$\lambda = \lambda(k) = \lambda(0) + \lambda'(0)k + \frac{\lambda''(0)}{2}k^2 + O(\varepsilon^3) = \pm(v+w) \pm \frac{v+w}{8wv} (V_1 + V_2)^2 \bar{g}^2 \varepsilon^2 + O(\varepsilon^3).$$

Таким образом, доказана следующая теорема.

Теорема 2. В некоторой окрестности точки $\lambda = v + w$ ($\lambda = -(v + w)$) для достаточно малых $\varepsilon > 0$ существует единственное собственное значение λ_+ (единственный резонанс λ_-) оператора H_ε , аналитически зависящее от ε , для которого справедлива формула

$$\lambda_\pm = \pm(v + w) \pm \frac{v + w}{8wv}(V_1 + V_2)^2 \bar{g}^2 \varepsilon^2 + O(\varepsilon^3).$$

§ 3. Уравнение Липпмана–Швингера

Найдем решение ψ_0 уравнения $H_0 \psi_0 = \lambda \psi_0$, отвечающее рассеивающему состоянию. Ищем ψ_0 в виде

$$\psi_0(n) = \begin{pmatrix} Ae^{ikn} \\ Be^{ikn} \end{pmatrix}, \quad A, B = \text{const.}$$

Подставляя ψ_0 , имеем

$$\begin{cases} cwBe^{-ik} + vB - \lambda A = 0, \\ vA + wAe^{ik} - \lambda B = 0, \end{cases}$$

или

$$\begin{pmatrix} -\lambda & we^{-ik} + v \\ we^{ik} + v & -\lambda \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A \\ B \end{pmatrix} = 0.$$

Полученная система имеет ненулевое решение, если ее определитель равен нулю, т. е. $\lambda = \pm \sqrt{w^2 + v^2 + 2vw \cos k}$ и $B = \frac{\lambda}{we^{-ik} + v} A$. Следовательно,

$$\psi_0(n) = \begin{pmatrix} Ae^{ikn} \\ \frac{\lambda A}{we^{-ik} + v} e^{ikn} \end{pmatrix}.$$

Условие нормировки для ψ_0

$$A^2 + \frac{\lambda^2 A^2}{|we^{-ik} + v|^2} = 1$$

выполнено, если $A = \frac{\sqrt{2}}{2}$. Итак,

$$\psi_0(n) = \frac{\sqrt{2}}{2} \begin{pmatrix} e^{ikn} \\ \frac{\lambda e^{ikn}}{we^{-ik} + v} \end{pmatrix}.$$

Теорема 3. Предположим, что ε достаточно мало и $k = D\varepsilon$, $D \neq 0$. Тогда существует единственное решение уравнения Липпмана–Швингера для оператора H_ε , имеющее вид

$$\psi_1(n) = \frac{\sqrt{2}}{2} \mp \frac{\sqrt{2}\bar{g}(w+v)(V_1+V_2)}{4wviD \pm 2\bar{g}(w+v)(V_1+V_2)} + O(\varepsilon), \quad \psi_2(n) = -\frac{\sqrt{2}\bar{g}(w+v)(V_1+V_2)}{4wviD \pm 2\bar{g}(w+v)(V_1+V_2)} + O(\varepsilon),$$

где $\bar{g} = \sum_{n \in \mathbb{Z}} g(n)$, знак « $\pm$ » соответствует знаку переменной $\lambda = \pm(w+v)$.

Доказательство. Уравнение Липпмана–Швингера для оператора H_ε имеет вид

$$\begin{aligned} \psi_1(n) &= \frac{\sqrt{2}}{2} e^{ikn} - \frac{\varepsilon}{2wvi \sin k} \sum_{n' \in \mathbb{Z}} (\lambda V_1 \psi_1(n') + v V_2 \psi_2(n')) g(n') e^{ik|n-n'|} - \\ &\quad - \frac{\varepsilon}{2vi \sin k} \sum_{n' \in \mathbb{Z}} V_2 g(n') \psi_2(n') e^{ik|n-1-n'|}, \\ \psi_2(n) &= \frac{\sqrt{2}}{2} \frac{\lambda e^{ikn}}{we^{-ik} + v} - \frac{\varepsilon}{2wvi \sin k} \sum_{n' \in \mathbb{Z}} (\lambda V_2 \psi_2(n') + v V_1 \psi_1(n')) g(n') e^{ik|n-n'|} - \\ &\quad - \frac{\varepsilon}{2vi \sin k} \sum_{n' \in \mathbb{Z}} V_1 g(n') \psi_1(n') e^{ik|n+1-n'|}. \end{aligned} \quad (11)$$

Введем обозначение $\varphi_i(n) = \sqrt{|g(n)|}\psi_i(n)$, $i = 1, 2$. В условиях теоремы и в силу (1) (знак « $\pm$ » далее соответствует знаку переменной λ) перепишем (11) следующим образом:

$$\begin{aligned}\varphi_1(n) &= \frac{\sqrt{2}}{2}\sqrt{|g(n)|} - \frac{\sqrt{|g(n)|}}{2wviD} \sum_{n' \in \mathbb{Z}} (\pm(w+v)V_1\varphi_1(n') + vV_2\varphi_2(n')) \sqrt{g(n')} - \\ &\quad - \frac{\sqrt{|g(n)|}}{2viD} \sum_{n' \in \mathbb{Z}} V_2\sqrt{g(n')}\varphi_2(n') + \varepsilon(L_{11}(\varepsilon)\varphi_1 + L_{12}(\varepsilon)\varphi_2)(n), \\ \varphi_2(n) &= \pm\frac{\sqrt{2}}{2}\sqrt{|g(n)|} - \frac{\sqrt{|g(n)|}}{2wviD} \sum_{n' \in \mathbb{Z}} (\pm(w+v)V_2\varphi_2(n') + vV_1\varphi_1(n')) \sqrt{g(n')} - \\ &\quad - \frac{\sqrt{|g(n)|}}{2viD} \sum_{n' \in \mathbb{Z}} V_1\sqrt{g(n')}\varphi_1(n') + \varepsilon(L_{21}(\varepsilon)\varphi_1 + L_{22}(\varepsilon)\varphi_2)(n),\end{aligned}$$

где L_{sk} , $s, k = 1, 2$, аналитически зависят от ε .

Положим $L = \begin{pmatrix} L_{11} & L_{12} \\ L_{21} & L_{22} \end{pmatrix}$, $\xi = \begin{pmatrix} \xi_1 \\ \xi_2 \end{pmatrix}$, $\xi = (1 - \varepsilon L)(\varphi_1, \varphi_2)$. Тогда

$$\begin{aligned}\xi_1(n) &= \frac{\sqrt{2}}{2}\sqrt{|g(n)|} - \frac{(v+w)\sqrt{|g(n)|}}{2wviD} (\pm V_1(((1 - \varepsilon L)^{-1}\xi)_1, \sqrt{g}) + V_2(((1 - \varepsilon L)^{-1}\xi)_2, \sqrt{g})), \\ \xi_2(n) &= \pm\frac{\sqrt{2}}{2}\sqrt{|g(n)|} - \frac{(v+w)\sqrt{|g(n)|}}{2wviD} (V_1(((1 - \varepsilon L)^{-1}\xi)_1, \sqrt{g}) \pm V_2(((1 - \varepsilon L)^{-1}\xi)_2, \sqrt{g})),\end{aligned}\quad (12)$$

и

$$\xi_1(n) = \frac{\sqrt{2}}{2}\sqrt{|g(n)|} - \frac{(v+w)\sqrt{|g(n)|}}{2wviD} C_1(\varepsilon), \quad \xi_2(n) = \pm\frac{\sqrt{2}}{2}\sqrt{|g(n)|} - \frac{(v+w)\sqrt{|g(n)|}}{2wviD} C_2(\varepsilon). \quad (13)$$

Подставим (13) в (12), получим систему

$$\begin{aligned}C_1(\varepsilon) &= \pm V_1 \left(\frac{\sqrt{2}}{2} - \frac{(v+w)}{2wviD} C_1(\varepsilon) \right) \left(((1 - \varepsilon L)^{-1}\sqrt{|g|})_1, \sqrt{g} \right) + \\ &\quad + V_2 \left(\pm\frac{\sqrt{2}}{2} - \frac{(v+w)}{2wviD} C_2(\varepsilon) \right) \left(((1 - \varepsilon L)^{-1}\sqrt{|g|})_2, \sqrt{g} \right), \\ C_2(\varepsilon) &= V_1 \left(\frac{\sqrt{2}}{2} - \frac{(v+w)}{2wviD} C_1(\varepsilon) \right) \left(((1 - \varepsilon L)^{-1}\sqrt{|g|})_1, \sqrt{g} \right) \pm \\ &\quad \pm V_2 \left(\pm\frac{\sqrt{2}}{2} - \frac{(v+w)}{2wviD} C_2(\varepsilon) \right) \left(((1 - \varepsilon L)^{-1}\sqrt{|g|})_2, \sqrt{g} \right),\end{aligned}$$

или

$$\begin{aligned}\begin{pmatrix} 2wviD \pm (\bar{g} + O(\varepsilon))(v+w)V_1 & (\bar{g} + O(\varepsilon))(v+w)V_2 \\ (\bar{g} + O(\varepsilon))(v+w)V_1 & 2wviD \pm (\bar{g} + O(\varepsilon))(v+w)V_2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} C_1 \\ C_2 \end{pmatrix} = \\ = \frac{\sqrt{2}}{2}(V_1 + V_2)(\bar{g} + O(\varepsilon)) \begin{pmatrix} \pm 1 \\ 1 \end{pmatrix}.\end{aligned}\quad (14)$$

Система (14) имеет единственное решение:

$$C_1 = \frac{\Delta_1}{\Delta} + O(\varepsilon), \quad C_2 = \frac{\Delta_2}{\Delta} + O(\varepsilon),$$

где

$$\begin{aligned}\Delta_1 &= \mp\sqrt{2}wviD\bar{g}(w+v)(V_1 + V_2), \quad \Delta_2 = -\sqrt{2}wviD\bar{g}(w+v)(V_1 + V_2) = \pm\Delta_1, \\ \Delta &= -4w^2v^2D^2 \pm 2wviD\bar{g}(w+v)(V_1 + V_2).\end{aligned}$$

Заметим, что $\Delta \neq 0$, т.к. v и w положительные числа (см. введение), значения $V_1, V_2, D, \bar{g}$ — вещественные, $D \neq 0$, тогда хотя бы действительная часть Δ не равна нулю. $\square$

Заметим, что условие $k = O(\varepsilon)$ означает малость как потенциала, так и скоростей частиц.

§ 4. Рассеяние

В окрестности точки λ_0 из непрерывного спектра оператора H_0 перепишем уравнение Липпмана–Швингера (11) для оператора H_ε в виде

$$\begin{aligned}\psi_1(n) &= \frac{\sqrt{2}}{2} e^{ikn} - \frac{\varepsilon}{2wvi \sin k} \sum_{n' \in \mathbb{Z}} (\lambda V_1 \psi_1(n') + v V_2 \psi_2(n')) g(n') e^{ik(n-n')} - \\ &\quad - \frac{\varepsilon}{2wvi \sin k} \sum_{n' > n} (\lambda V_1 \psi_1(n') + v V_2 \psi_2(n')) g(n') (e^{-ik(n-n')} - e^{ik(n-n')}) - \\ &\quad - \frac{\varepsilon}{2vi \sin k} \sum_{n' \in \mathbb{Z}} V_2 g(n') \psi_2(n') e^{ik(n-1-n')} - \\ &\quad - \frac{\varepsilon}{2vi \sin k} \sum_{n' > n-1} V_2 g(n') \psi_2(n') (e^{-ik(n-1-n')} - e^{ik(n-1-n')}), \\ \psi_2(n) &= \frac{\sqrt{2}}{2} \frac{\lambda e^{ikn}}{we^{-ik} + v} - \frac{\varepsilon}{2wvi \sin k} \sum_{n' \in \mathbb{Z}} (\lambda V_2 \psi_2(n') + v V_1 \psi_1(n')) g(n') e^{ik(n-n')} - \\ &\quad - \frac{\varepsilon}{2wvi \sin k} \sum_{n' > n} (\lambda V_2 \psi_2(n') + v V_1 \psi_1(n')) g(n') (e^{-ik(n-n')} - e^{ik(n-n')}) - \\ &\quad - \frac{\varepsilon}{2vi \sin k} \sum_{n' \in \mathbb{Z}} V_1 g(n') \psi_1(n') e^{ik(n+1-n')} - \\ &\quad - \frac{\varepsilon}{2vi \sin k} \sum_{n' > n+1} V_1 g(n') \psi_1(n') (e^{-ik(n+1-n')} - e^{ik(n+1-n')}),\end{aligned}$$

или

$$\begin{aligned}\psi_1(n) &= \frac{\sqrt{2}}{2} e^{ikn} - \frac{\varepsilon}{2wvi \sin k} \sum_{n' \in \mathbb{Z}} (\lambda V_1 \psi_1(n') + v V_2 \psi_2(n')) g(n') e^{-ik(n-n')} - \\ &\quad - \frac{\varepsilon}{2wvi \sin k} \sum_{n' < n} (\lambda V_1 \psi_1(n') + v V_2 \psi_2(n')) g(n') (e^{ik(n-n')} - e^{-ik(n-n')}) - \\ &\quad - \frac{\varepsilon}{2vi \sin k} \sum_{n' \in \mathbb{Z}} V_2 g(n') \psi_2(n') e^{-ik(n-1-n')} - \\ &\quad - \frac{\varepsilon}{2vi \sin k} \sum_{n' < n-1} V_2 g(n') \psi_2(n') (e^{ik(n-1-n')} - e^{-ik(n-1-n')}), \\ \psi_2(n) &= \frac{\sqrt{2}}{2} \frac{\lambda e^{ikn}}{we^{-ik} + v} - \frac{\varepsilon}{2wvi \sin k} \sum_{n' \in \mathbb{Z}} (\lambda V_2 \psi_2(n') + v V_1 \psi_1(n')) g(n') e^{-ik(n-n')} - \\ &\quad - \frac{\varepsilon}{2wvi \sin k} \sum_{n' < n} (\lambda V_2 \psi_2(n') + v V_1 \psi_1(n')) g(n') (e^{ik(n-n')} - e^{-ik(n-n')}) - \\ &\quad - \frac{\varepsilon}{2vi \sin k} \sum_{n' \in \mathbb{Z}} V_1 g(n') \psi_1(n') e^{-ik(n+1-n')} - \\ &\quad - \frac{\varepsilon}{2vi \sin k} \sum_{n' < n+1} V_1 g(n') \psi_1(n') (e^{ik(n+1-n')} - e^{-ik(n+1-n')}).\end{aligned}$$

Отсюда

$$\begin{aligned}\psi_1(n, k) &= \frac{\sqrt{2}}{2} e^{ikn} + A_1^\pm(k) e^{\pm ikn} + \eta_1^\pm(n, k), \\ \psi_2(n, k) &= \frac{\sqrt{2}}{2} \frac{\lambda e^{ikn}}{w e^{-ik} + v} + A_2^\pm(k) e^{\pm ikn} + \eta_2^\pm(n, k)\end{aligned}$$

(знаки «+» и «-» отвечают $n > 0$ и $n \leq 0$ соответственно), где

$$\begin{aligned}A_1^\pm(k) &= -\frac{\varepsilon}{2wvi \sin k} \sum_{n' \in \mathbb{Z}} (\lambda V_1 \psi_1(n') + v V_2 \psi_2(n')) g(n') e^{\mp ikn'} - \\ &\quad - \frac{\varepsilon}{2vi \sin k} \sum_{n' \in \mathbb{Z}} V_2 g(n') \psi_2(n') e^{\mp ik(n'+1)},\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}A_2^\pm(k) &= -\frac{\varepsilon}{2wvi \sin k} \sum_{n' \in \mathbb{Z}} (\lambda V_2 \psi_2(n') + v V_1 \psi_1(n')) g(n') e^{\mp ikn'} - \\ &\quad - \frac{\varepsilon}{2vi \sin k} \sum_{n' \in \mathbb{Z}} V_1 g(n') \psi_1(n') e^{\mp ik(n'-1)},\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}\eta_1^+(n, k) &= -\frac{\varepsilon}{2wvi \sin k} \sum_{n' > n} (\lambda V_1 \psi_1(n') + v V_2 \psi_2(n')) g(n') (e^{-ik(n-n')} - e^{ik(n-n')}) - \\ &\quad - \frac{\varepsilon}{2vi \sin k} \sum_{n' > n-1} V_2 g(n') \psi_2(n') (e^{-ik(n-1-n')} - e^{ik(n-1-n')}),\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}\eta_1^-(n, k) &= -\frac{\varepsilon}{2wvi \sin k} \sum_{n' < n} (\lambda V_1 \psi_1(n') + v V_2 \psi_2(n')) g(n') (e^{ik(n-n')} - e^{-ik(n-n')}) - \\ &\quad - \frac{\varepsilon}{2vi \sin k} \sum_{n' < n-1} V_2 g(n') \psi_2(n') (e^{ik(n-1-n')} - e^{-ik(n-1-n')}),\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}\eta_2^+(n, k) &= -\frac{\varepsilon}{2wvi \sin k} \sum_{n' > n} (\lambda V_2 \psi_2(n') + v V_1 \psi_1(n')) g(n') (e^{-ik(n-n')} - e^{ik(n-n')}) - \\ &\quad - \frac{\varepsilon}{2vi \sin k} \sum_{n' > n+1} V_1 g(n') \psi_1(n') (e^{-ik(n+1-n')} - e^{ik(n+1-n')}),\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}\eta_2^-(n, k) &= -\frac{\varepsilon}{2wvi \sin k} \sum_{n' < n} (\lambda V_2 \psi_2(n') + v V_1 \psi_1(n')) g(n') (e^{ik(n-n')} - e^{-ik(n-n')}) - \\ &\quad - \frac{\varepsilon}{2vi \sin k} \sum_{n' < n+1} V_1 g(n') \psi_1(n') (e^{ik(n+1-n')} - e^{-ik(n+1-n')}).\end{aligned}$$

Легко видеть, что функция

$$\eta(n, k) = \begin{pmatrix} \eta_1(n, k) \\ \eta_2(n, k) \end{pmatrix},$$

где

$$\eta_1(n, k) = \begin{cases} \eta_1^+(n, k), & n > 0, \\ \eta_1^-(n, k), & n \leq 0, \end{cases} \quad \eta_2(n, k) = \begin{cases} \eta_2^+(n, k), & n > 0, \\ \eta_2^-(n, k), & n \leq 0, \end{cases}$$

является аналитической $l^2(\mathbb{Z}) \times l^2(\mathbb{Z})$ -значной функцией в окрестности точки λ_0 (доказательство аналогичного утверждения см. в [7]).

Определим $P_+ = \left| \frac{\sqrt{2}}{2} + A_1^+ \right|^2 + \left| \frac{\sqrt{2}}{2} \frac{\lambda}{w e^{-ik} + v} + A_2^+ \right|^2$ — вероятность прохождения, $P_- = |A_1^-|^2 + |A_2^-|^2$ — вероятность отражения.

Теорема 4. В условиях теоремы 3 справедливы равенства

$$P_+ = \left| \frac{2wviD}{2wviD \pm (w+v)(V_1+V_2)\bar{g}} \right|^2 + O(\varepsilon), \quad P_- = \left| \frac{(w+v)(V_1+V_2)\bar{g}}{2wviD \pm (w+v)(V_1+V_2)\bar{g}} \right|^2 + O(\varepsilon).$$

Доказательство. Используя результаты теоремы 3, имеем

$$\begin{aligned} A_1^+ &= -\frac{\bar{g}}{2wviD} \left(\frac{\sqrt{2}}{2} + C \right) (\pm V_1(w+v) \pm vV_2) \mp \frac{\bar{g}V_2}{2viD} \left(\frac{\sqrt{2}}{2} + C \right) + O(\varepsilon) = \\ &= \mp \frac{(w+v)\bar{g}}{2wviD} \left(\frac{\sqrt{2}}{2} + C \right) (V_1+V_2) + O(\varepsilon) = \mp \frac{\sqrt{2}}{2} \frac{(w+v)(V_1+V_2)\bar{g}}{2wviD \pm (w+v)(V_1+V_2)\bar{g}} + O(\varepsilon), \\ A_2^+ &= -\frac{\bar{g}}{2wviD} \left(\frac{\sqrt{2}}{2} + C \right) (V_2(w+v) + vV_1) - \frac{\bar{g}V_1}{2viD} \left(\frac{\sqrt{2}}{2} + C \right) + O(\varepsilon) = \\ &= -\frac{w+v}{2wviD} \left(\frac{\sqrt{2}}{2} + C \right) \bar{g}(V_1+V_2) + O(\varepsilon) = -\frac{\sqrt{2}}{2} \frac{(w+v)(V_1+V_2)\bar{g}}{2wviD \pm (w+v)(V_1+V_2)\bar{g}} + O(\varepsilon), \end{aligned}$$

где $C = \mp \frac{\sqrt{2}\bar{g}(w+v)(V_1+V_2)}{4wviD \pm 2\bar{g}(w+v)(V_1+V_2)}$. Очевидно, что с точностью до $O(\varepsilon)$ справедливы равенства $A_1^+ = A_1^-$, $A_2^+ = A_2^-$ и

$$\begin{aligned} P_+ &= \left| \frac{\sqrt{2}}{2} \mp \frac{\sqrt{2}}{2} \frac{(w+v)(V_1+V_2)\bar{g}}{2wviD \pm (w+v)(V_1+V_2)\bar{g}} \right|^2 + \left| \pm \frac{\sqrt{2}}{2} - \frac{\sqrt{2}}{2} \frac{(w+v)(V_1+V_2)\bar{g}}{2wviD \pm (w+v)(V_1+V_2)\bar{g}} \right|^2 = \\ &= \left| \frac{2wviD}{2wviD \pm (w+v)(V_1+V_2)\bar{g}} \right|^2, \\ P_- &= \left| \frac{(w+v)(V_1+V_2)\bar{g}}{2wviD \pm (w+v)(V_1+V_2)\bar{g}} \right|^2. \end{aligned}$$

□

Заметим, что при $V_1 = -V_2$ и $\bar{g} = 0$ отражение отсутствует.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

- Hasan M.Z., Kane C.L. Colloquium: topological insulators // Reviews of Modern Physics. 2010. Vol. 82. Issue 4. P. 3045–3067. DOI: [10.1103/RevModPhys.82.3045](https://doi.org/10.1103/RevModPhys.82.3045)
- Bardarson J.H., Moore J.E. Quantum interference and Aharonov–Bohm oscillations in topological insulators // Rep. Progr. Phys. 2013. Vol. 76. No. 5. 056501. DOI: [10.1088/0034-4885/76/5/056501](https://doi.org/10.1088/0034-4885/76/5/056501)
- Asbóth J.K., Oroszlány L., Pályi A. A short course on topological insulators: band-structure topology and edge states in one and two dimensions / Lecture Notes in Physics. 2016. Vol. 919. DOI: [10.1007/978-3-319-25607-8](https://doi.org/10.1007/978-3-319-25607-8)
- Ruzicka F. Hilbert space inner products for $\mathcal{PT}$ -symmetric Su–Schrieffer–Heeger models // International Journal of Theoretical Physics. 2015. Vol. 54. Issue 11. P. 4154–4163. DOI: [10.1007/s10773-015-2531-4](https://doi.org/10.1007/s10773-015-2531-4)
- Leijnse M., Flensberg K. Introduction to topological superconductivity and Majorana fermions // Semiconductor Science and Technology. 2012. Vol. 27. No. 12. 124003. DOI: [10.1088/0268-1242/27/12/124003](https://doi.org/10.1088/0268-1242/27/12/124003)
- Тинюкова Т.С. Двумерный разностный оператор Дирака в полосе // Вестник Удмуртского университета. Математика. Механика. Компьютерные науки. 2015. Т. 25. Вып. 1. С. 93–100. DOI: [10.20537/vm150110](https://doi.org/10.20537/vm150110)
- Тинюкова Т.С. Рассеяние в случае дискретного оператора Шрёдингера для пересекающихся квантовых проволок // Вестник Удмуртского университета. Математика. Механика. Компьютерные науки. 2012. Вып. 3. С. 74–84. DOI: [10.20537/vm120308](https://doi.org/10.20537/vm120308)

Поступила в редакцию 01.02.2017

Тинюкова Татьяна Сергеевна, к. ф.-м. н., доцент, кафедра математического анализа, Удмуртский государственный университет, 426034, Россия, г. Ижевск, ул. Университетская, 1.

E-mail: ttinyukova@mail.ru

T. S. Tinyukova

Scattering and quasilevels in the SSH model

Citation: *Vestnik Udmurtskogo Universiteta. Matematika. Mekhanika. Komp'yuternye Nauki*, 2017, vol. 27, issue 2, pp. 257–266 (in Russian).

Keywords: resolution, spectrum, eigenvalue, resonance, Lippmann–Schwinger equation, probability of reflection.

MSC2010: 81Q10, 81Q15

DOI: [10.20537/vm170209](https://doi.org/10.20537/vm170209)

Topological insulator is a special type of material that represents an insulator in the interior (“in bulk”) and conducts electricity on the surface. The simplest topological insulator is a finite chain of atoms in polyacetylene. In the last decade topological insulators are actively studied in the physics literature. A great interest to topological insulators (and also to topologically similar superconducting systems) is due to the presence of a link between “volume” and “boundary”. In this article, we have studied the discrete model SSH (Su–Schrieffer–Heeger) for polyacetylene. This model describes an electron in a one-dimensional chain of atoms with two alternating amplitudes of the transition to a neighboring atom. We have found the spectrum and resolution of this operator. The quasilevels (eigenvalues and resonances) in the case of a small potential have been investigated. In addition, we obtained a solution of the Lippmann–Schwinger equation and asymptotic formulas for the probability of transmission and reflection in case of small perturbation.

REFERENCES

1. Hasan M.Z., Kane C.L. Colloquium: topological insulators, *Reviews of Modern Physics*, 2010, vol. 82, issue 4, pp. 3045–3067. DOI: [10.1103/RevModPhys.82.3045](https://doi.org/10.1103/RevModPhys.82.3045)
2. Bardarson J.H., Moore J.E. Quantum interference and Aharonov–Bohm oscillations in topological insulators, *Rep. Progr. Phys.*, 2013, vol. 76, no. 5, 056501. DOI: [10.1088/0034-4885/76/5/056501](https://doi.org/10.1088/0034-4885/76/5/056501)
3. Asbóth J.K., Oroszlány L., Pályi A. *A short course on topological insulators: band-structure topology and edge states in one and two dimensions*, Lecture Notes in Physics, 2016, vol. 919. DOI: [10.1007/978-3-319-25607-8](https://doi.org/10.1007/978-3-319-25607-8)
4. Ruzicka F. Hilbert space inner products for $\mathcal{PT}$ -symmetric Su–Schrieffer–Heeger models, *International Journal of Theoretical Physics*, 2015, vol. 54, issue 11, pp. 4154–4163. DOI: [10.1007/s10773-015-2531-4](https://doi.org/10.1007/s10773-015-2531-4)
5. Leijnse M., Flensberg K. Introduction to topological superconductivity and Majorana fermions, *Semiconductor Science and Technology*, 2012, vol. 27, no. 12, 124003. DOI: [10.1088/0268-1242/27/12/124003](https://doi.org/10.1088/0268-1242/27/12/124003)
6. Tinyukova T.S. Two-dimensional difference Dirac operator in the strip, *Vestn. Udmurt. Univ. Mat. Mekh. Komp'yut. Nauki*, 2015, vol. 25, issue 1, pp. 93–100 (in Russian). DOI: [10.20537/vm150110](https://doi.org/10.20537/vm150110)
7. Tinyukova T.S. Scattering in the case of the discrete Schrödinger operator for intersected quantum wires, *Vestn. Udmurt. Univ. Mat. Mekh. Komp'yut. Nauki*, 2012, issue 3, pp. 74–84 (in Russian). DOI: [10.20537/vm120308](https://doi.org/10.20537/vm120308)

Received 01.02.2017

Tinyukova Tat'yana Sergeevna, Candidate of Physics and Mathematics, Associate Professor, Department of Mathematical Analysis, Udmurt State University, ul. Universitetskaya, 1, Izhevsk, 426034, Russia.

E-mail: ttinyukova@mail.ru